УДК 01.01.77

РАЗРАБОТКА КОМПЬЮТЕРНОЙ МОДЕЛИРУЮЩЕЙ СИСТЕМЫ ПРОЦЕССА ДЕГИДРИРОВАНИЯ n-ПАРАФИНОВ C_{10}–C_{13}

Е.Н. Ивашкина, А.В. Кравцов, Э.Д. Иванчина, С.В. Сизов

Томский политехнический университет
E-mail: MikhaylovaEN@yandex.ru

Разработана компьютерная моделирующая система процесса дегидрирования н-парафинов C_{10}–C_{13}, в основе которой лежит формализованный механизм превращения углеводородов на поверхности Pt-катализатора. Данная система позволяет производить расчеты текущих показателей процесса и катализатора в течение всего цикла его работы, проводить прогнозные расчеты параметров процесса с учетом специфики перерабатываемого сырья и технологических условий; прогнозировать длительность межрегенерационного цикла работы Pt-катализатора дегидрирования.

В настоящее время во многих отраслях науки и техники используются новые информационные технологии, базирующиеся на методе математического моделирования. Данные технологии позволяют осуществить компьютеризацию производства, что дает преимущество в принятии важных решений, потому что не требуют специальных знаний в области математики и программирования. Одновременно с этим данные технологии могут служить базой для создания различных обучающих программ и тренажеров, позволяющих повысить опыт инженеров-технологов без существенных материальных вложений и потерь, т. к. нет необходимости проводить обучение на реально действующем объекте [1–3].

Основу любой моделирующей компьютерной системы составляет математическая модель процесса, полученная на основе корреляционных, статистических, физико-химических и других закономерностей. Наибольшей надежностью обладают модели, основанные на фундаментальных законах. Особенно это проявляется при моделировании сложных химических процессов, где от правильного задания механизма и кинетики превращения углеводородов на поверхности катализаторов зависит точность проводимых расчетов. Использование данных компьютерных систем на реально действующих производствах позволяют продлевать срок службы катализатора за счет оптимизации режимов его использования, особенно ярко это проявляется для процессов нефтехимии, характеризующихся своей многокомпонентностью и многостадийностью.

Одним из таких процессов является процесс получения н-моноолефинов C_{10}–C_{13}, как сырья для производства синтетических моющих средств, путем дегидрирования соответствующих парафинов на платиновых катализаторах. Этот процесс реализуется на ПО «ООО «Киришинефтеоргсинтез» с 1996 г. (технология Пакол-Дифайн). Потребность в синтетических моющих средствах постоянно растет. Поэтому повышение эффективности процесса производства синтетических моющих средств является важной и актуальной задачей, которая решается с использованием метода математического моделирования.

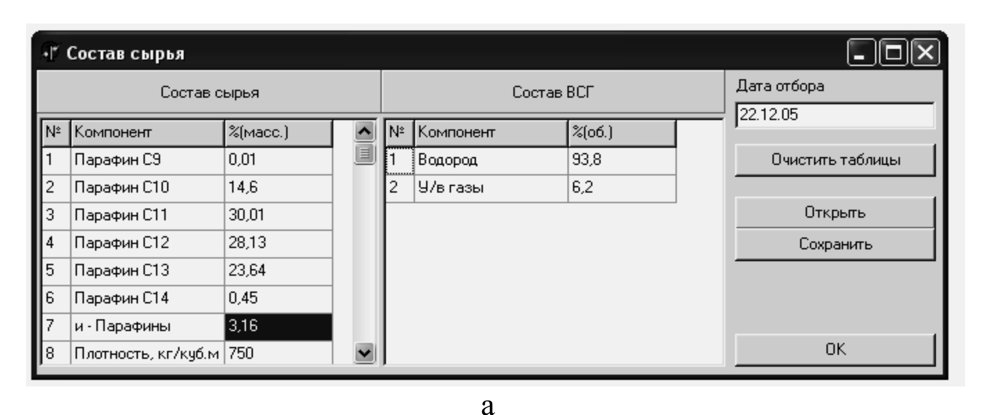
Таким образом, целью данной работы является разработка компьютерной моделирующей системы процесса дегидрирования парафинов, в основе которой лежит нестационарная кинетическая модель с учетом падения активности катализатора вследствие отложения на нем кокса.

На основе математического описания процесса дегидрирования была создана компьютерная моделирующая система ПАКОЛ. Эта программа разработана в среде Delphi 7 и предназначена для использования в операционных системах семейства Windows.

Активное окно данной программы представлено на рис. 1. В данном окне осуществляется вызов



Рис. 1. Главное окно программы



а

Технологические условия Пакол

Технологические условия процесса Пакол

Дата 09.10.04

№	Параметр	Значение
3	Расход сырья, куб.м/ч	75,01
4	Мольное соотношение водород/сырье	7
5	Объем катализатора, куб.м	3,14
6	Насыпная плотность, кг/куб.м	330
7	Объем переработанного сырья, тыс.куб.м	326,86
8	Выход олефинов %(масс.) на сырье	7,62
9	Перепад температуры по реактору	19,74

Очистить | Открыть | Сохранить | OK

б

Рис. 2. Окна ввода исходной информации: а) состав сырья, б) технологические условия

окон для ввода состава сырья и технологических условий, вызов окна с результатами расчетов и выбор варианта расчета.

Для проведения расчета текущей активности необходимо переключить «Тип расчета» в соответствующую позицию. Далее необходимо задать состав сырья и технологические параметры процесса. Для задания состава сырья и технологических условий необходимо вызвать соответствующие окна в указанных областях на рис. 2.

Окна ввода состава сырья и технологических условий показаны на рис. 2.

В окно ввода состава сырья вводится состав исходного сырья, т. е. массовое содержание парафинов, а также плотность сырья. Аналогично вводится состав водородсодержащего газа (ВСГ), только в объемных процентах. В данном окне предусмотрено сохранение и загрузка составов сырья.

Технологические условия задаются в окне, рис. 2, *б*. В окно вводятся следующие параметры:

- Начальная температура процесса, °С.
- Давление в реакторе, МПа.
- Расход сырья (жидкой фазы), м³/ч.
- Мольное соотношение ВСГ/сырье.
- Объем катализатора, м³.
- Насыпная плотность, кг/м³.
- Объем переработанного сырья, тыс. м³.
- Текущий выход олефинов в продукте, мас. %.
- Перепад температуры по реактору, °С.

Результаты расчета

Продукты Пакола

№	Компонент	18.04.2004	15.05.2004	15.06.2004	15.07.2004	15.08.2004	15.09.2004	09.10.2004
1	Парафин С9	0,02	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01
2	Парафин С10	14,02	15,28	14,79	13,49	12,76	11,51	12,17
3	Парафин С11	30,66	30,46	29,39	27,73	27,5	28,68	28,64
4	Парафин С12	25,15	24,71	25	25,99	28,53	30,03	26,24
5	Парафин С13	18,3	18,59	19,41	21,84	20,78	17,83	20,22
6	Парафин С14	0,4	0,3	0,33	0,42	0,4	0,4	0,51
7	Олефин С9	0	0	0	0	0	0	0
8	Олефин С10	1,12	1,21	1,2	1,05	0,91	0,96	1,05
9	Олефин С11	2,46	2,41	2,39	2,17	1,97	2,39	2,49
10	Олефин С12	2,02	1,96	2,04	2,03	2,05	2,51	2,28
11	Олефин С13	1,47	1,48	1,58	1,71	1,49	1,49	1,76
12	Олефин С14	0,03	0,02	0,03	0,03	0,03	0,03	0,04
13	Парафины	88,56	89,35	88,93	89,47	89,98	88,46	87,78
14	Олефины	7,11	7,09	7,25	7	6,45	7,38	7,62
15	Изопарафины	3,92	3,21	3,43	3,18	3,25	3,72	4,1
16	Ароматика	0,35	0,29	0,32	0,29	0,26	0,36	0,42
17	Диолефины	0,06	0,06	0,07	0,06	0,06	0,07	0,08
18	Кокс	0,1312	0,3806	0,9398	0,995	1,6229	2,6426	3,6845
19	Начальная темпера	472,8	473,5	476,4	474,6	472,2	484,1	489,9
20	Конечная температ	455,9	456,5	459,2	458,1	457,1	467,1	472,4
21	Активность	0,982	0,948	0,877	0,87	0,797	0,691	0,597
22	Объем переработа	22,4	71,9	126,8	181,3	235,1	285,5	326,9
23	Время контакта, с	0,13	0,13	0,13	0,13	0,14	0,12	0,12

Рис. 3. *Результаты расчета текущей активности катализатора*

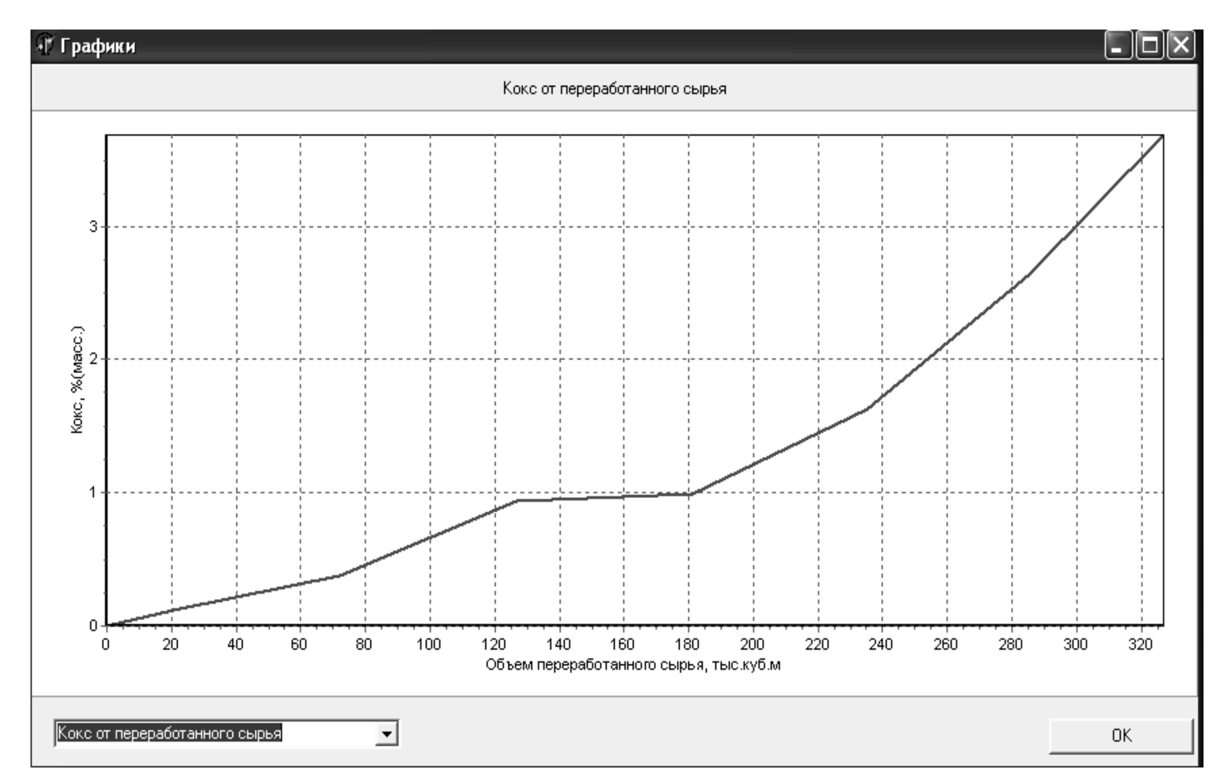


Рис. 4. *Окно вывода графического материала*

Так же, как и в окне ввода состава сырья, предусмотрено сохранение и загрузка технологических параметров.

После задания всей исходной информации производят расчет текущей активности катализатора по алгоритму, приведенному ниже. О выполнении расчета показывает линия прогресса внизу главного окна. После выполнения расчета для просмотра результатов вызывают окно результатов, рис. 3.

В данном окне представляется состав жидких продуктов реактора, содержание кокса, текущая активность катализатора, время контакта.

Для более наглядного представления предусмотрено построение графических зависимостей различных показателей от объема переработанного сырья, таких как:

- активность катализатора;
- массовое содержание кокса на катализаторе;
- выход олефинов;
- температура входа в реактор дегидрирования.

Окно вывода графического материала представлено на рис. 4.

Выполнение прогнозных расчетов практически совпадает с расчетом текущей активности. Различие заключается в задании технологических условий выхода олефинов и не требует задания исходной температуры. Прогнозный расчет проводится до температуры входа 500 °С. Просмотр результатов осуществляется так же, как и при расчете текущей активности.

Для определения текущей активности катализатора используется следующий алгоритм:

1. Задание начальных условий: температуры, давления, объемного расхода, объема катализатора, состава сырья и водородсодержащего газа, выхода олефинов и т. д.
2. Расчет начальных концентрации веществ.
3. Расчет реактора (решение дифференциальных уравнений методом Рунге-Кутта).
4. Расчет состава продукта и выхода олефинов.
5. Проверка совпадения расчетного и экспериментального значения выхода олефинов.

Для определения максимального количества переработанного сырья воспользуемся следующим алгоритмом:

1. Задание начальных условий.
2. Расчет реактора.
3. Расчет состава продуктов.
4. Проверка совпадения расчетного и экспериментального значения выхода олефинов. При совпадении рассчитывается значение накопленного кокса, рассчитывается значение активности. Если выход олефинов не совпадает, происходит корректировка температуры.
5. Проверяют значение температуры. Если температура не превышает предельного значения, то переходят к пп. 2.

С помощью разработанной компьютерной моделирующей системы можно производить расчет текущего состояния катализатора и прогнозировать максимальный объем переработанного сырья при заданных технологических условиях и составе сырья.

Так, были произведены расчеты и исследована работа катализатора дегидрирования в период с августа 2002 г. по февраль 2003 г. В качестве исходной информации использовались значения технологических параметров за каждый месяц и результаты аналитического контроля производства: данные по составу сырья, ВСГ и выходу олефинов. Результаты расчетов работы установки в период с 07.08.2002 по 06.02.2003 представлены на рис. 5, 6.

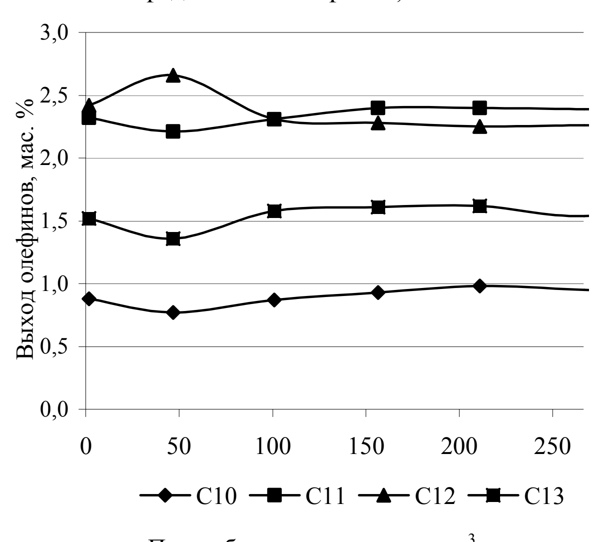


Рис. 5. *Изменение выхода олефинов в зависимости от объема переработанного сырья (расчет на модели)*

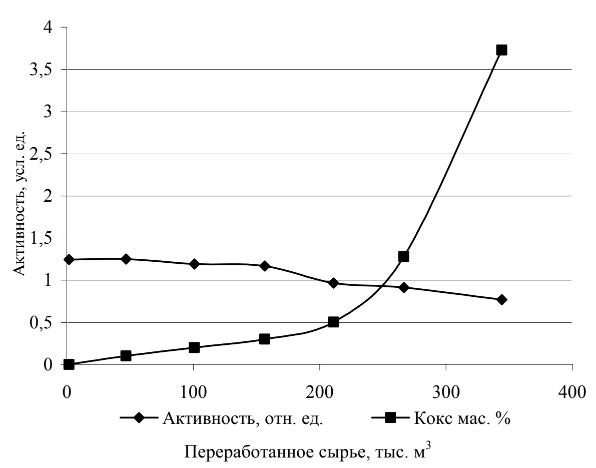


Рис. 6. *Изменение активности Pt-катализатора дегидрирования в период с 07.08.2002 по 06.02.2003 (расчет на модели)*

Наряду с текущими показателями процесса представляют собой интерес расчеты, связанные с прогнозированием срока службы катализатора в зависимости от специфики перерабатываемого сырья, а также технологических параметров (рис. 7).

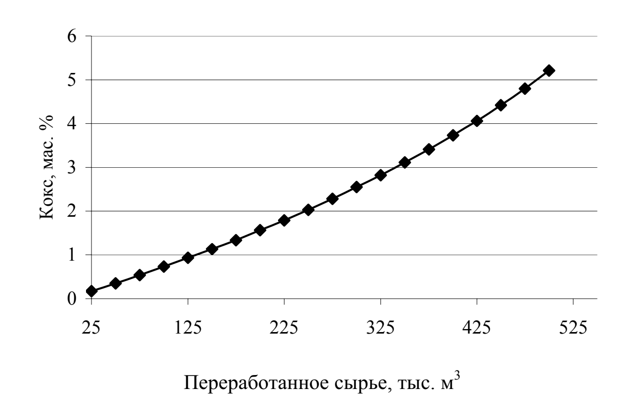


Рис. 7. *Прогноз работы катализатора на 19.10.2004 г. (расчет на модели)*

При объеме переработанного сырья около 500 тыс. м^3 содержание кокса на катализаторе составило 5,21 мас. %, что отличается от реальных данных на 0,04 %.

Таким образом, на основе математической модели процесса [4] построена компьютерная моделирующая система процесса ПАКОЛ, реализующегося на ПО «ООО «Киришинефтеоргсинтез», и проведены расчеты по работе Pt-катализатора в период с 07.08.2002 по 06.02.2003. Приведена динамика коксонакопления на его поверхности в течение всего цикла, а также селективности по целевым продуктам в зависимости от температурного режима. Показано, что данная система позволяет прогнозировать длительность межрегенерационного цикла работы Pt-катализатора процесса дегидрирования.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. http://www.technoil.ru
2. Кравцов А.В., Иванчина Э.Д Технологические компьютерные системы – новый этап в развитии методов управления процессами переработки углеводородного сырья // Нефтепереработка и нефтехимия. – 2005. – № 9. – С. 40–43.
3. Михайлова Е.Н., Кравцов А.В., Иванчина Э.Д., Мельник Д.И. Моделирование процесса дегидрирования н-парафинов C_9–C_{14} в адиабатическом реакторе с неподвижным слоем Pt-катализатора // Известия Томского политехнического университета. – 2006. – Т. 309. – № 2. – С. 170–173.

УДК 553.985:547.537:54.02